

# Моделирование свойств модифицированных графеновых структур

В. В. Муравьев, В. Н. Мищенко

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск; e-mail: mishchenko@bsuir.by*

Выполнено исследование параметров и характеристик химически модифицированных графеновых структур методом ab-initio моделирования (моделирование из первых принципов). Материал графен считается одним из наиболее перспективных материалов для формирования новых полупроводниковых приборов диапазонов СВЧ и КВЧ, а также оптических диапазонов. Однако его использование в полупроводниковой электронике сдерживается наличием ряда проблем, и в частности, проблемы, связанной с отсутствием зазора между валентной зоной и зоной проводимости. Одно из возможных решений этой проблемы связано с разработкой модифицированных графеновых структур, которые представляют собой структуры, состоящие из двухмерного графена, атомы которого связаны с атомами других материалов, например, водорода или фтора. Для использования полученных структур в новых полупроводниковых приборах необходимо определить их основные электрофизические параметры и характеристики, такие как, эффективная масса электронов, значения зазоров между долинами и ряд других параметров и характеристик.

**Ключевые слова:** графен, полупроводниковая структура, зонная структура, водород, фтор

## Введение

Графен стал предметом многих исследований, проводимых в последнее время, благодаря ряду своих уникальных свойств и характеристик, в том числе своим особым электронным транспортным свойствам [1]. Проведенные исследования показали, что для этого материала существует ряд проблем, и в частности, проблема, связанная с отсутствием зазора между валентной зоной и зоной проводимости, что препятствует его использованию в полупроводниковой электронике. Химические модификации графена с использованием атомов водорода или фтора недавно стала предметом исследования как возможный вариант для решения этой проблемы [2, 3]. Анализ этих структур показал, что они представляют собой соединение, состоящее из двухмерного графена, связанного с атомами водорода или фтора. Соответственно, формируются структуры гидрированного и фторированного графена. Как правило, полученные таким образом структуры являются полупроводниками, который обладают новыми свойствами и характеристиками. Они представляет собой объект исследований, как для фундаментальной науки, так и возможных технологических приложений и создания новых полупроводниковых структур. Для изучения свойств и характеристик модифицированных графеновых структур было выполнено их ab-initio моделирование.

## 1. Метод и особенности моделирования модифицированных графеновых структур

Ab-initio моделирование было выполнено с помощью программы Quantum Espresso [4], применяя параметризацию Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) и обобщенное градиентное приближение GGA (generalized gradient approximation). Была использована величина энергии отсечки для волновых функций равная  $40 R_y$  (внесистемная единица измерения  $R_y$  используется в атомной физике и оптике;  $1 R_y$  приблизительно равен  $13,6$  эВ). Зона Бриллюэна была дискретизирована с помощью сетки вида Monkhorst-Pack размером  $24 \times 24 \times 1$ . В область моделирования, сверху и снизу анализируемой структуры, были включены слои вакуума каждый толщиной  $20 \text{ bohr}$  (внесистемная единица измерения длины  $\text{bohr}$ ;  $1 \text{ bohr}$  приблизительно равен  $0,0529177 \text{ м}^{\circ}$ ). Значения эффективной массы электронов и другие параметры исследуемого материала были

получены из результатов моделирования с использованием теории функционала электронной плотности DFT-GGA.

## 2. Результаты моделирования параметров и характеристик модифицированных графеновых структур *ab-initio* методом

Результаты моделирования исследованных структур для 100 % и 50 % гидрированного и фторированного графена (для обозначения этих структур используются записи H100 %, H50 %, F100 % и F50 %, соответственно) хорошо согласуются с результатами, ранее уже полученными в [2, 3]. Некоторые результаты в виде зонных диаграмм для рассматриваемых структур F50 % и H50 % представлены на рис. 1, *а* и рис. 1, *б*, соответственно. Как видно из анализа рис. 1, *а* и рис. 1, *б*, выполнение технологических операций гидрирования и фторирования исходного двумерного графена приводит в новых структурах к появлению энергетического зазора между зоной проводимости и валентной зоной. При моделировании электронных характеристик и параметров отмеченных выше структур необходим анализ параметров трех долин вида Г, М и К.

Эффективные массы электронов для графеновых структур F50 % и H50 % были рассчитаны с учетом величины энергетического зазора между зоной проводимости и валентной зоной для зонных диаграмм, которые имеют долины вида Г, М и К.

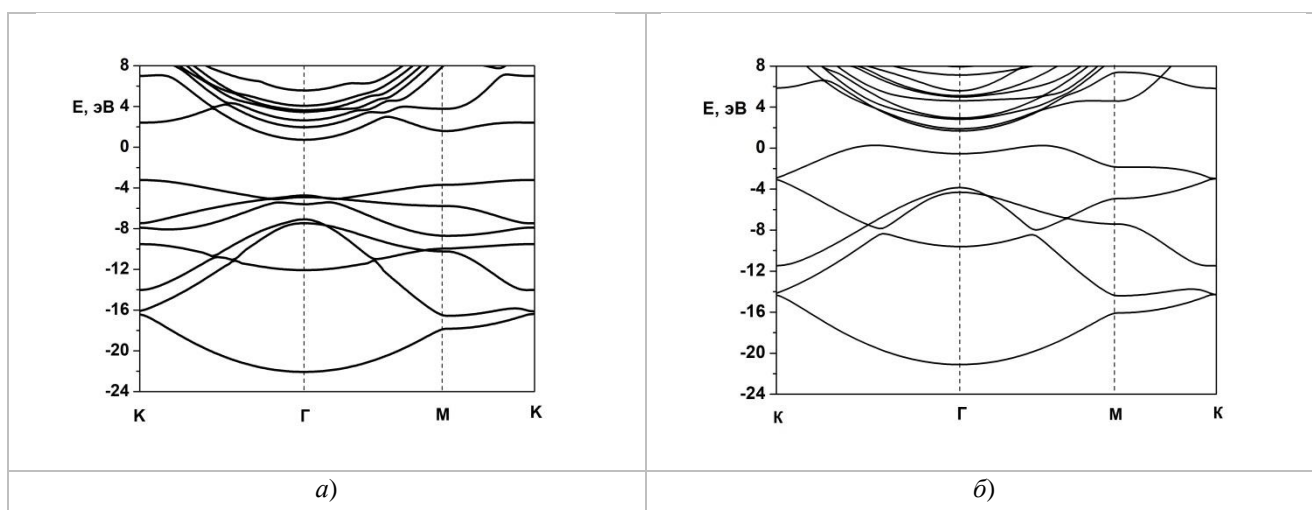


Рис.1. – Зонные диаграммы F50 % (*а*) и H50 % (*б*) графеновых структур.

Для расчета эффективной массы электронов долин Г, М и К, отмеченных выше структур, использовалась формула из [5]

$$m_e = \frac{m_0}{1 + \frac{2 \cdot p_0^2}{m_0 \cdot E_g}} \quad (1)$$

где  $m_0$  – масса электрона в свободном пространстве,  $E_g$  – энергетический зазор между зоной проводимости и валентной зоной для долины, для которой производится расчет эффективной массы электронов, параметр  $p_0 \approx \frac{h}{a_0}$ , где  $h = 2\pi \cdot \hbar$  – постоянная Планка,  $a_0$  – постоянная решетки структуры. Моделирование показывает, что значения эффективной массы электронов в долине Г для F50 % и H50 % графеновых структур составляют относительную величину 0,901 и 0,788 от массы электрона в свободном пространстве, соответственно.

## Заклучение

Проведено моделирование электрофизических свойств и характеристик трехмерных полупроводниковых структур, сформированных на базе графена и атомов водорода или фтора. Получение такого рода модифицированных графеновых структур возможно путем технологических операций гидрирования и фторирования исходного двухмерного графена. Значения эффективной массы электронов и ряд других параметров был получен из результатов ab-initio моделирования с использованием теории функционала плотности типа DFT-GGA. Благодаря использованию модифицированных графеновых структур с улучшенными характеристиками переноса носителей заряда становится возможным получение новых полупроводниковых приборов для различных частотных диапазонов. Высокие значения подвижности носителей заряда и теплопроводности делают графен и разнообразные структуры, полученные на его основе, перспективной основой для создания новых полупроводниковых приборов различных диапазонов частот с хорошими выходными характеристиками.

## Литература

1. Elias D. C., Nair R. R., Mohiuddin T. M. G., Morozov S. V., Blake P., Halsall M. P., Ferrari A. C., Boukhvalov D. W., Katsnelson M. I., Geim A. K. and Novoselov K. S. Control of Graphene's Properties by Reversible Hydrogenation: Evidence for Graphene. *Science*. 2009. Vol. 323, P. 610.
2. Sahin H., Leenaerts O., Singh S. K. and Peeter F. M. *Wires Comput. Mol. Sci. GraphAne: From Synthesis to Applications*. 2015. Vol. 5, P. 255.
3. Bruzzone S., Fiori G. Ab-initio simulations of deformation potentials and electron mobility in chemically modified graphene and two-dimensional hexagonal boron-nitride. *Appl. Phys. Lett.* 2011. Vol. 99, P. 22108.
4. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G. L., Cococcioni M., Dabo I. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2017. Vol. 29, P. 465901.
5. Hermann C., Weisbuch C.  $k \rightarrow p$  perturbation theory in III-V compounds and alloys: a reexamination. *Physical Review*. 1977. Vol. B15, P. 823.

## Modelling the properties of modified graphene structures

V.V. Murav'ev 1, V.N. Mishchenka

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk;*  
*e-mail: mishchenko@bsuir.by*

The study of parameters and characteristics of modified graphene structures by ab-initio simulation (first-principles simulation) is performed. Graphene material is considered one of the most promising materials for the formation of new semiconductor devices in the microwave and high frequency ranges. However, its use in digital semiconductor electronics is constrained by a number of problems, and in particular, the problem associated with the lack of a gap between the valence band and the conduction band. One possible solution to this problem involves the development of modified graphene structures, which are a structures consisting of two-dimensional graphene whose atoms are bonded to hydrogen or fluorine atoms. To use these materials in new semiconductor devices it is necessary to obtain its main electrophysical parameters and characteristics, such as the effective mass of electrons, valley gaps values and a number of other parameters and characteristics.

**Keywords:** graphene, semiconductor structure, zone structure, hydrogen, fluorine